

ОСОБЕННОСТИ СТЕКЛОВАНИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ С РАЗЛИЧНЫМ РАЗМЕРНЫМ НЕСООТВЕТСТВИЕМ КОМПОНЕНТОВ

Король А.В.

Руководитель – д.ф.-м.н., профессор Косилов А.Т.

Воронежский государственный технический университет, г. Воронеж

avk.vrn@gmail.com

Введение. В последнее время появился ряд работ, указывающих на наличие в металлических стеклах (МС) структурных элементов с икосаэдрической симметрией, а также на увеличение доли икосаэдрического ближнего порядка в процессе стеклования. В работах [1-3] рассматривались процессы самоорганизации икосаэдрических структурных элементов в процессе стеклования. Показано, что в основе структурной организации МС лежит формирование политетраэдрического перколяционного кластера. Формирование икосаэдрической политетраэдрической упаковки может значительно облегчаться, если в центрах икосаэдров располагаются атомы меньшего радиуса. Поэтому если рассматривать стеклование как процесс формирования икосаэдрического перколяционного кластера, то критериями легкого стеклования сплава могут служить количественное соотношение компонент в сплаве и их размерное несоответствие.

В данной работе методом статистико-геометрического анализа изучалось влияние размерного несоответствия на формирование аморфной структуры в чистом железе, и сплавах $\text{Ni}_{60}\text{Ag}_{40}$ и $\text{Cu}_{80}\text{Zr}_{20}$. Размерное несоответствие атомов в системах Fe, $\text{Ni}_{60}\text{Ag}_{40}$, $\text{Cu}_{80}\text{Zr}_{20}$ составляет 0, 14 и 20 % соответственно.

Методика эксперимента. Исходные модели систем содержали 100000 атомов, размещенных случайным образом в основном кубе с периодическими граничными условиями. Взаимодействие между атомами Fe описывалось с помощью эмпирического Пака-Доямы; взаимодействие атомов в системах Cu-Zr и Ag-Ni описывалось в рамках метода погруженного атома [4]. Атомам сообщались скорости согласно распределению Максвелла при температуре 2300 К и проводилась закалка систем в рамках метода молекулярной динамики. Процедура молекулярно-динамического расчета состояла в численном интегрировании уравнений движения с временным шагом $\Delta t = 1,5 \cdot 10^{-15}$ с по скоростному алгоритму Верле [5].

Процедура закалки носила циклический характер и сводилась к ступенчатому понижению температуры системы, поддержанию этой температуры в течение $10^3 \cdot \Delta t$ и последующему отжигу в адиабатических условиях в течение $1,9 \cdot 10^4 \cdot \Delta t$. После каждого цикла закалки методом

статической релаксации атомы переводили в равновесные положения, фиксируя тем самым состояние систем при $T = 0$. Для статически релаксированных моделей рассчитывались потенциальная энергия U_0 , произведение давления на объем P_0V , а также в рамках статистико-геометрического анализа на основе построения многогранников Вороного (МВ) и кластерного анализа изучалась атомная структура сплава на всех этапах ее перестройки в процессе закалки.

Результаты. В рамках статистико-геометрического анализа путем построения многогранников Вороного были изучены закономерности формирования ближнего порядка аморфной структуры исследуемых сплавов в процессе закалки из жидкой фазы в интервале температур 2300 К – 0 К. Установлено, что наиболее интенсивно происходит увеличение доли атомов, находящихся в центрах многогранников Вороного (0-0-12-0), которым соответствует координационный многогранник (КМ) икосаэдр. Число икосаэдров в моделях после закалки составило 8 %, 8,1 % и 13,7 % для аморфного железа и систем $\text{Ni}_{60}\text{Ag}_{40}$ и $\text{Cu}_{80}\text{Zr}_{20}$ соответственно, а число атомов, задействованных на построение икосаэдров в системах составило 59.02, 59.26 и 74.72 %. Как и предполагалось в системах $\text{Ni}_{60}\text{Ag}_{40}$ и $\text{Cu}_{80}\text{Zr}_{20}$ в центрах практически всех икосаэдров находились меньшие по размеру атомы Ni и Cu.

Структурная самоорганизация икосаэдрических координационных многогранников в процессе закалки моделей была изучена в рамках теории протекания. Было показано, что при температуре вблизи температуры стеклования в каждом сплаве формируется перколяционный кластер из взаимопроникающих и контактирующих между собой икосаэдров. Для выяснения характера сопряжения икосаэдров в перколяционном кластере были построены парциальные функции радиального распределения (ФРР) атомов, находящихся в центрах взаимопроникающих и контактирующих по граням ребрам и вершинам икосаэдров. Было обнаружено, что в чистом железе и сплаве $\text{Ni}_{60}\text{Ag}_{40}$ перколяционный кластер формируется путем взаимопроникающих контактов икосаэдров, а также контактов икосаэдров по граням, ребрам и вершинам. В системе же $\text{Cu}_{80}\text{Zr}_{20}$ перколяционный кластер образуют взаимопроникающие и контактирующие только по граням икосаэдры.

На рис.1 показано распределение числа нанокластеров N_C , образованных взаимопроникающими икосаэдрами, по числу образующих их икосаэдров N_I в моделях рассматриваемых систем. Видно, что в модели аморфного железа наибольший по размеру нанокластер содержал 20 взаимопроникающих икосаэдров. В системе $\text{Ni}_{60}\text{Ag}_{40}$ наблюдается рост числа нанокластеров, содержащих пять и более взаимопроникающих икосаэдров, а наибольший кластер состоял из 48 взаимопроникающих икосаэдров. Модели системы $\text{Cu}_{80}\text{Zr}_{20}$ содержала значительное число

крупных нанокластеров, а наибольший нанокластер содержал 270 взаимопроникающих икосаэдров.

Для определения геометрических характеристик икосаэдрических нанокластеров изучалось распределение числа икосаэдров, по числу взаимопроникающих связей в моделях исследуемых сплавов. Была обнаружена тенденция к уменьшению числа изолированных икосаэдров и увеличению доли икосаэдров являющихся элементами разветвленных цепочек с увеличением размерного несоответствия.

Таким образом, можно утверждать, что наличие размерного несоответствия способствует частичной компенсации напряжений вызванных формированием икосаэдрической упаковки, что способствует формированию большего числа икосаэдрических нанокластеров, увеличению их размера и разветвленности.

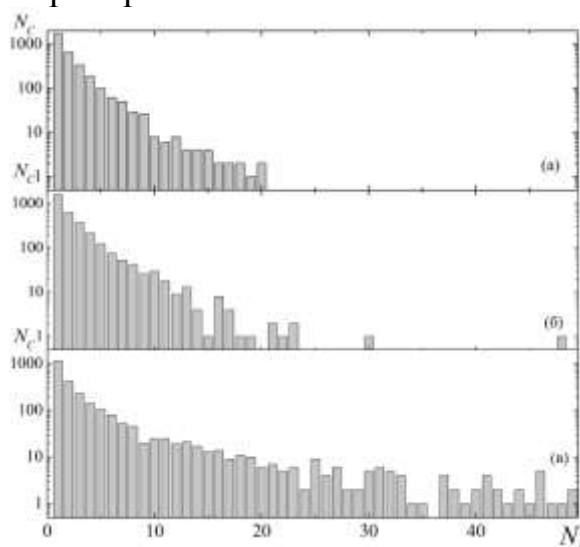


Рис.1. Распределение числа нанокластеров N_c , образованных взаимопроникающими икосаэдрами, по числу образующих их икосаэдров N_i в моделях а – Fe, б – $Ni_{60}Ag_{40}$, в – $Cu_{80}Zr_{20}$

Литература.

1. Евтеев А.В. Структурная модель стеклования чистых металлов / А.В. Евтеев, А.Т. Косилов, Е.В. Левченко // Письма в ЖЭТФ.– 76.– 2002.– с.115–117
2. Прядильщиков А.Ю. Молекулярно–динамическое изучение процесса стеклования бинарного сплава $Ni_{60}Ag_{40}$ / А.Ю. Прядильщиков, А.Т. Косилов, А.В. Евтеев, Е.В. Левченко // ЖЭТФ.– 132.– 2007.– с.1352–1358
3. Король А.В. Структурная организация металлического стекла $Cu_{80}Zr_{20}$ / А.В. Король, А.Т. Косилов, А.В. Миленин и др. // ЖЭТФ.– 139.– 2011.– с.1158–1165
4. Daw M.S. Embedded–Atom Method: Derivation and Application to Impurities, Surfaces, and other Defects in Metals / M.S. Daw, M.I. Baskes // Phys. Rev. B.– 29.– 1984.– p.6443–6453
5. Verlet L. Computer Experiments on Classical Fluids. I. Thermodynamic Properties of Lennard–Jones Molecules / L. Verlet // Phys. Rev.– 159.– 1967.– p.98–103